



TITLE:

## 27.パターンのコンピューターシミュレーション(パターン形成の運動及び統計,研究会報告)

AUTHOR(S):

川崎, 恭治; 山中, 勝伸

---

CITATION:

川崎, 恭治 ...[et al]. 27.パターンのコンピューターシミュレーション(パターン形成の運動及び統計,研究会報告). 物性研究 1986, 46(6): 904-908

ISSUE DATE:

1986-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92289>

RIGHT:

文 献

- \* K. Kawasaki and T. Nagai, J. Phys. C に投稿中。
- 1) K. Kawasaki and T. Nagai, Physica 121A (1983) 175.
- 2) T. Nagai and K. Kawasaki, Physica 120A (1983) 587.
- 3) H. Ikeda, J. Phys. C16 (1983) 3563.
- 4) H. Ikeda, J. Phys. C に投稿中。
- 5) T. Nagai and K. Kawasaki, 発表予定。
- 6) T. Nagai and K. Kawasaki, Physica 134A (1986) 483.

## 27. パターンのコンピューターシミュレーション

九大・理 川崎恭治, 山中勝伸

最近, いろいろな物質の変化に富んだパターン, またはその複雑な動きに多くの視線が注がれている。このことは, 物性理論の世界に, 次のような時代が到来しつつあることを物語っていると思う。つまり, それは, 物質全体の情報から必要とする観測量を引き出すのではなく, 適切な情報の縮約によって観測量を計算するという時代の到来である。私たちは, 適切な情報の縮約を受けたものをパターンと呼び, そのパターンから観測量を導き出すことが今後の課題であろう。

私たちは, その第一歩として,  $2\text{H-TaSe}_2$  中に起こる CDW の整合・不整合相転移に着目した。この系の自由エネルギーは, 整合項と不整合項の競争という形を持つが, 不整合相は, 部分的には整合領域であり, エネルギー的に縮退した整合領域の集合と見なすことができる。私たちが, ここで取り扱うのは, その整合領域間の界面 (整合欠陥, 略して “DC” と呼ぶ) であり, この DC が様々なパターンを提供してくれる。

私たちは, 今回のコンピューターシミュレーションをドメイン構造をもつパターンの運動を再現するものとしてとらえており, 他の物質にも適用できると信じている。

私たちは, パターンの運動方程式を導出する基礎として TDGL 方程式を採用し, それに情報の縮約という操作をし, パターンの運動方程式を得た。その詳細については, K. Kawasaki, Ann. Phys. (N.Y.) 154 (1984) 319 を見てもらうことにして, ここでは, DC と DL (転位)



図1 曲線 DC に働く曲率力

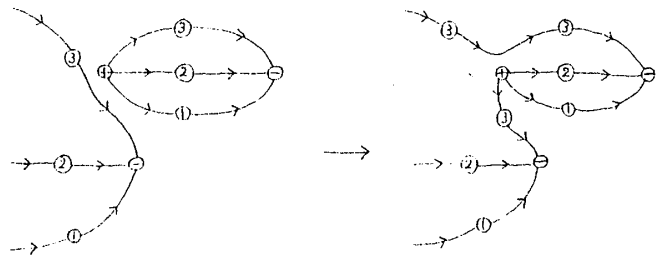


図4 基本的な DC の組み換え。

① は, DC の種類を示す。

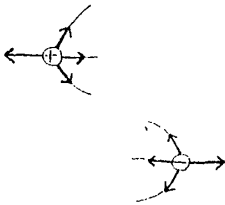


図2 DL に働く力

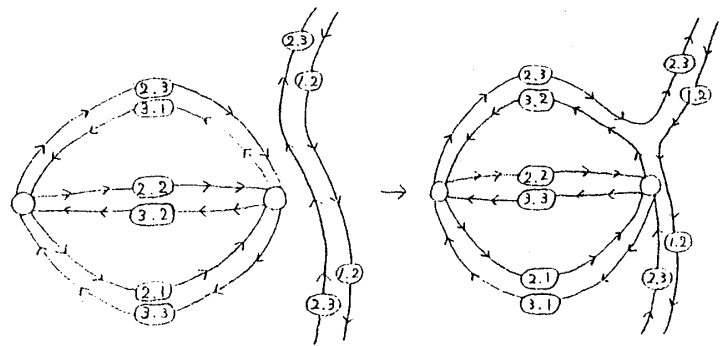


図5 3 秩序変数の共存におけるパターンの再構成図。

①, ② は, 秩序変数の種類と DC の種類を示す。

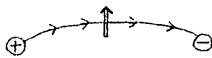


図3 ±DL と方向を持った DC。

↑ は位相増加の方向を示す。

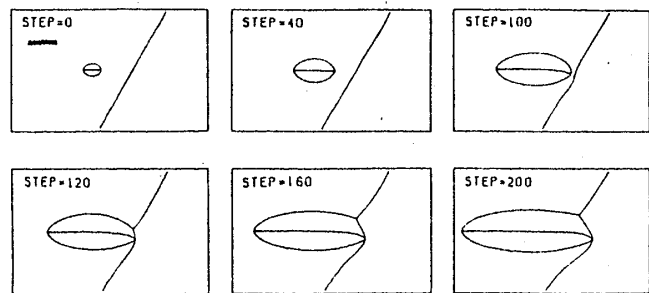


図6 図5 に対応するコンピュータシミュレーション。

曲線は DC を表わしているが, 実際は図5 に示されているように 2 本の DC が重なっている。

は DC の幅を意味する。

式(2)の右辺第二項は界面を平らにし、第一項はそれを波立たせる。これら二項が釣り合う  $r$  方向の長さは

$$\lambda(t) \sim \sqrt{\frac{D\xi}{v}} e^{r\bar{Z}(t)/\xi} \quad (3)$$

ここで、 $r$  は  $O(1)$  の正定数、 $\bar{Z}(t)$  は、系全体にわたって平均した、 $x$  方向のドメイン・サイズである。 $D \rightarrow \infty$  のとき、系は引力相互作用をもつ平らな界面系となり、 $\bar{Z}(t)$  は  $\ln t$  で成長する。 $D$  が有限になると、この平らな界面系は不安定になり、 $\lambda(t)$  より長波長の波が立つ。界面の波立ちは、界面の消滅過程に新しい機構をもたらす。すなわち、隣り合う二つの界面の一部が波立ちにより近付くと指数関数型引力により更に接近し接触する。そして、接触した界面部分は消滅し、そこに空孔ができる(図2のH)。この小さな空孔は、界面エネルギーを小さくするためにある速度  $u$  で、 $r$  平面のすべての方向に拡がって行く。今、 $x$  方向と  $r$  方向の特徴的な時間をそれぞれ

$$\tau_x \equiv \bar{Z}(t)/(v e^{-r'\bar{Z}(t)/\xi}), \quad \tau_r \equiv \lambda(t)/u, \quad (4)$$

とする。ここで  $r'$  は  $O(1)$  の正定数。 $\tau_x \ll \tau_r$  ならば、系は平面系と見なせるが、 $\tau_x \gg \tau_r$  ならば、発生した空孔は急速に大きくなって、その二つの界面を完全に消滅させてしまう。すなわち、最初に空孔ができた部分以外の大部分は、どんなに離れていても消滅させられる。最初の空孔の発生は、引力による一次元キンク対の消滅(内的消滅)であるが、それが  $r$  方向に拡がることによる消滅(外的消滅)は多次元性を反映した新しい消滅機構である。

この新しい消滅機構はドメイン・サイズの分布関数  $g(z, t)$  に影響を及ぼす。今、直径  $\lambda(t)$  の  $x$  方向に伸びた円柱の領域に注目する。この中では、界面は平らと考えてよい。この円柱領域外での空孔発生は、この円柱領域の外的消滅のトリガーになる。このトリガーは  $r$  方向に多数存在し、かつ  $\tau_x \gg \tau_r$  であるから、円柱領域内での内的消滅は無視することができる。外的消滅だけを考えると、消滅するドメインはそのサイズに依らないので、 $g(z, t)$  の時間発展は次式で与えられる：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} g(z, t) = & \Gamma(t) \left\{ -g(z, t) + \int_0^\infty dz' \int_0^\infty dz'' \right. \\ & \left. \times g(z', t) g(z'', t) g(z - z' - z'', t) \right\} \end{aligned} \quad (5)$$

ただし、

$$g(z, t) \equiv 0, \quad z < 0.$$

右辺の第一項は、 $g(z, t)$  の減少を、第二項は増大を表わす。 $\Gamma(t)$  は単位時間当りに起こる外的消滅の回数で、 $\tau_x^{-1} \tau_r^{-(d-1)}$  ( $d$  は空間次元) に比例するものとする、

$$\Gamma(t) \sim \bar{Z}(t)^{-1} e^{-\bar{Z}(t)/\nu \xi}, \quad (\nu \text{ は正定数}) \quad (6)$$

今、(5) 式が次の形のスケール解を持つことを要請する：

$$g(z, t) = \bar{Z}(t)^{-1} g^*(Z/\bar{Z}(t)). \quad (7)$$

そうすると、スケール方程式の係数として出てくる、

$$\beta \equiv \Gamma(t) \bar{Z}(t) / \frac{d\bar{Z}(t)}{dt} \quad (8)$$

は定数でなければならない。その結果、スケール関数は次のように求まる：

$$g^*(x) = (2\pi x)^{-1/2} e^{-x/2} \quad (9)$$

このスケール関数は、 $x \sim 1$  の領域で、一次元キंक系のものと違いが大きい<sup>6)</sup>。後で見るように、上の結果は、 $S_K(t)$  の  $K\bar{Z}(t) \sim 1$  でのふるまいを変え、理論と実験とのギャップを埋める。一方、成長則は (6) 式と (8) 式から、

$$\bar{Z}(t) \sim \nu \xi \ln t \quad (10)$$

これは正に一次元キंक系と同じ対数成長則である。これらのことから、“系の成長は内的消滅によって支配されるが、ドメイン・サイズの分布は外的消滅によっている” と言うことができる。散乱構造関数のスケール関数は、(9) から次のように求まる：

$$\mathcal{S}(K\bar{Z}(t)) = \frac{8}{(a+1)^{3/2} [(a+1)^{1/2} + 2^{1/2}]}, \quad (11)$$

ここで、

$$a \equiv \{1 + [2K\bar{Z}(t)]^2\}^{1/2}.$$

これを図 1 に実線でプロットする。それは実験とよく一致している。従って、われわれは次のように結論する：“層状イジング磁性体  $\text{Rb}_2\text{Co}_{0.7}\text{Mg}_{0.3}\text{F}_4$  での秩序形成に於いては、層内秩序が完全にできてから層間秩序が進むのではなく、層内秩序は不完全で波を打っている状態のまま層間秩序ができて行く”

に働く力の定性的な説明だけにする。秩序変数として、位相 $\phi$ をとり、整合領域として

$$\phi = 0, \quad \frac{2\pi}{3}, \quad \frac{4\pi}{3}$$

の3つが存在するとしよう。そうすると、DCとしては、3領域に対応して3種類が存在する。DLは、その周囲で位相が反時計回りに $\pm 2\pi$ 変化するものだけを考える。

まずDCに働く力として、曲率によるものがあり、これは、曲がったDCを直線にしようとする力である(図1)。DCの部分間の相互作用は、双極電荷層に働くしゃへいされた静電気力と同じとした。DLについては、それに結び付いているDCから張力を受け、さらに $\pm DL$ で異なる符号をもつ misfit 力が働く(図2)。

最後にパターンの再構成について述べる。私たちがもっとも興味を持つのは、このパターンの再構成であるが、運動方程式はこのことについて多くを語らない。パターンの再構成に対するコンピューター制御は、かなり難しいもののように思われるが、基本的にはDLに結び付いているDCの組み換えである。この組み換えについては、 $+DL$ からDCを通して $-DL$ へ向かう方向性が役に立つ(図3, 図4)。

私たちが実際に行なったコンピューターシミュレーションは、3つの秩序変数が共存していて、先に説明した場合よりも複雑化しているが、基本的には1変数の場合と変わらないので、最後にシミュレーションの結果と、どのような再構成が起こったのか簡単な図で示すことにする(図5, 図6)。

## 28. 2次元XYスピングラスと渦状ドメイン

阪大・教養 川 村 光  
統計数理研 種 村 正 美

近年、スピングラスの研究が理論・実験両面から活発に行なわれているが、これらの系の振舞はスピンの対称性によって大きく異なっている。我々は容易面的対称性を持つXYスピングラスのモデルとして、以下のハミルトニアンで記述される2次元正方格子上的 plane rotator モデルのモンテカルロシミュレーションを行なった<sup>1,2)</sup>。